パイエルス系のソリトンと電子間相互作用

山口大理　原 純一郎
物性研　福山 秀敏　中野 隆

Su, Schrieffer と Heeger (SSH) がポリアセチレンにおけるソリトンの存在を提唱して以来，1次元電子-格子系のソリトンについて種々の研究がなされて来た。しかしながらそれらの研究は，電子間の相互作用がない場合[1)〜7)]か，又は，電子間の相互作用が斥力で強い極限の場合[8)]に限られていた。ここでは，電子間の相互作用を考慮に入れ，½あるいは⅓つまったバンドを持つ電子-格子系のソリトンについて議論する。

(1) ½つまったバンドの場合

SSHのハミルトニアンに電子間の相互作用を付け加えたものを，系のハミルトニアンとしよう。電子間の相互作用が十分弱いとし，電子場をボゾン表示[9),10)]すると，ハミルトニアンは，

$$H = \int dx \Big[A_\rho(\nabla\theta)^2 + A_\sigma(\nabla\phi)^2 + C_\rho P^2 + C_\sigma M^2 + B_\rho \cos 2\theta + B_\sigma \cos 2\phi - 2gu\cos\theta\cos\phi + Ku^2 \Big] \quad (1)$$

となる。ここで，θとφは電子場のボゾン表示の際に導入された位相の演算子であり，局所的な電荷密度 $\rho(x)$ とスピン密度 $m(x)$ とは，

$$\rho(x) = \frac{1}{\pi}\nabla\theta(x) \quad , \quad m(x) = \frac{1}{2\pi}\nabla\phi(x) \quad (2)$$

の関係で結ばれている。又，PとMはそれぞれθとφに正準共役な演算子である。$u(x)$ は格子のひずみを表し，g と K はそれぞれ電子-格子相互作用の結合定数と弾性定数である。A_ρ, A_σ, C_ρ 及び C_σ は，電子間の相互作用の強さに依存する定数であり[11),12)]，電子間の相互作用のない時は，$A_\rho = A_\sigma = v_F/4\pi$，$C_\rho = C_\sigma = \pi v_F$ (v_F はフェルミ速度) である。一方 B_ρ と B_σ は，電子間相互作用の内，ウムクラップ過程と後方散乱の強さを各々表している (以下，簡単の為 $B_\rho < 0$，$B_\sigma < 0$ の場合を考える)。見通しをよくする為に古典近似で議論をすすめよう (つまり(1)式において $C_\rho P^2$ と $C_\sigma M^2$ の項を無視する)。この近似では，系の安定な状態は，

$$A_\rho \Delta\theta + B_\rho \sin 2\theta - gu \sin\theta\cos\phi = 0 \quad , \quad (3)$$

$$A_\sigma \Delta\phi + B_\sigma \sin 2\phi - gu \cos\theta \sin\phi = 0 \quad , \quad (4)$$

$$Ku - g\cos\phi\cos\theta = 0 \quad (5)$$

の解として与えられ，基底状態は，$\theta(x)$，$\phi(x)$ とも場所 x に依存せず，$(\theta, \phi) = (m\pi, n\pi)$ である (図1. の黒点に対応)。局所的励起状態であるソリトンは，$x \to \pm\infty$ において $(\theta, \phi) \to (m\pi, n\pi)$ となるので，その軌跡を θ-φ 平面に投影すると，図1. の様に基底状態の間を結ぶ曲線として表される。(2)式より，直線Sは，スピン $S = \pm 1/2$，電荷 $Q = 0$ の中性ソリトン，直線Cは，$S = 0$

$Q=\pm e$ の電荷ソリトンに対応している事がわかる。
生成エネルギーは，

$$E_S = 4\sqrt{A_\sigma\left(\frac{g^2}{K}-2B_\sigma\right)}\ ,\qquad E_c = 4\sqrt{A_\rho\left(\frac{g^2}{K}-2B_\rho\right)}$$

となり電子間相互作用により，中性ソリトンと電荷ソリトンの生成エネルギーに差が生じ得る事を示している。 直線Pは，$A_\sigma = A_\rho = A$，$B_\sigma = B_\rho = B$ の場合のポーラロン（$S=\pm 1/2$，$Q=\mp e$）を表しており生成エネルギーは，

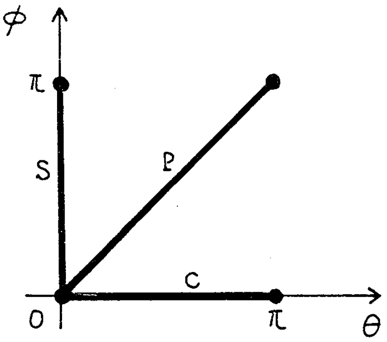

図 1

$$E_P = 2\sqrt{2A\left(\frac{g^2}{K}-4B\right)}\times\left[\sqrt{\lambda^2+1}+\frac{1}{\lambda}\ln\left|\lambda+\sqrt{\lambda^2+1}\right|\right]$$

である（$\lambda=\sqrt{g^2/(g^2-4BK)}$）。 この状態は，一般には（つまり $A_\sigma \neq A_\rho$，$B_\sigma \neq B_\rho$）直線Pからずれ，トポロジカルにも電子間相互作用のない時のポーラロンと違ってくる。

(2) 1/3つまったバンドの場合

この場合のハミルトニアンを古典近似で書くと，

$$E_3 = \int dx\left[A_\rho(\nabla\theta)^2 + A_\sigma(\nabla\phi)^2 + 2gu\sin(\theta-\theta_{ph})\cos\phi + \tilde{g}u^2\cos\phi\cos(\theta+2\theta_{ph}) + Ku^2\right] \tag{6}$$

となる。 ここで，θ_{ph} は $u_{2k_F} = u\exp i\theta_{ph}$ により定義されている（u_{2k_F} は格子のひずみの内，波数 $2k_F$（k_F はフェルミ波数）を持つ成分である）。 $\tilde{g}$ は，電子－格子のウムクラップ過程の結合定数である。 u と θ_{ph} の微小変化に対して状態が安定である為の条件（つまり $\delta E_3/\delta u=0$，$\delta E_3/\delta\theta_{ph}=0$）を使って，$\theta$ と ϕ に対する有効ハミルトニアンを導くと，

$$E_3(\theta,\phi) = \int dx\left[A_\rho(\nabla\theta)^2 + A_\sigma(\nabla\phi)^2 - \frac{g^2}{K}\frac{\cos^2\phi}{1-\alpha^2\cos^2\phi}\left(1+\alpha\cos\phi\cos3\theta\right)\right] \tag{7}$$

となる（$\alpha = \tilde{g}/K < 1$）。 基底状態は，$\theta(x)$，$\phi(x)$ とも場所 x によらず，$\theta-\phi$ 平面での位置は，図2.の黒点により示されている通りである。 この系のソリトンも，やはり基底状態を結ぶ曲線により表される。 図2の直線FC2は，$S=0$ $Q=\mp 2e/3$ を持つソリトン，曲線FC1は $S=\pm 1/2$，$Q=\mp e/3$ のソリトン，そして曲線Pは，ポーラロン（$S=\pm\frac{1}{2}$，$Q=\mp e$）を表している（曲線FC1とPは模式的なものである）。 これらは Su と Schrietter により見出された状態に対応しているが，$S=0$，$Q=\pm 4/3$ を持つソリトンは，我々のモデルでは見つからなかった。

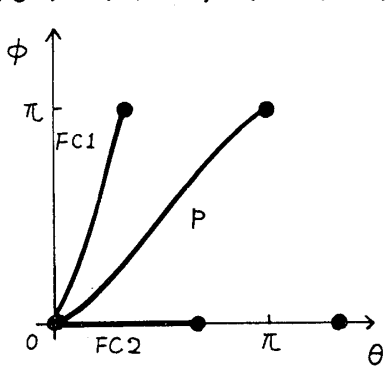

図 2

文献

1) W.P. Su, J.R. Schrietter and A.J. Heeger : Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 1698, Phys. Rev. B22 (1980) 2099.
2) W. P. Su and J. R. Schrietter : Phys. Rev. Lett. 46 (1981) 738.

3) M. J. Rice : Phys. Lett. 71A (1979) 152.
4) S. Brazovskii : Zh. Ekspa. and Teor. 78 (1980) 677.
5) H. Takayama, Y. R. Lin-Liu and K. Maki : Phys. Rev. B21 (1980) 2388.
6) B. Horovitz : Phys. Rev. Lett. 46 (1981) 742.
7) S. Brazovskii and N. Kirova : preprint.
8) T. Nakano and H. Fukuyama : J. Phys. Soc. Jpn. 49 (1980) 1679.
9) A. Luther and I. Peschel : Phys. Rev. B9 (1974) 2911.
10) A. Luther and V. J. Emery : Phys. Rev. Lett. 33 (1974) 589.
11) Y. Suzumura : Prog. Theor. Phys. 61 (1979) 1.
12) K. Takano, T. Nakano and H. Fukuyama : J. Phys. Soc. Jpn (in press).